第 51 卷 第 1 期 金属学报 Vol.51 No.1
2015 年 1 月 第 100-106 页 ACTA METALLURGICA SINICA Jan. 2015 pp.100-106

基于晶体塑性理论的晶界压痕行为研究*

闫五柱 [1,2] 张嘉振 [1,2] 周振功 [2] 岳珠峰 [3]

1) 中国商用飞机有限责任公司北京民用飞机技术研究中心, 北京 102211
2) 哈尔滨工业大学复合材料与结构研究所, 哈尔滨 150080
3) 西北工业大学工程力学系, 西安 710129

摘 要 为了研究晶界的压痕行为, 采用晶体塑性理论对单晶和双晶的压痕行为进行了有限元模拟, 得到了压痕表面和晶界位置处的应力分布. 结果表明, 相邻晶粒的晶体取向对压痕深度-载荷响应以及分解切应力分布均有较显著的影响. 压载荷作用下, 晶界位置处存在应力集中, 且晶体取向差异越大, 晶界应力越大.

关键词 压痕, 晶体塑性, 单晶, 双晶, 晶界, 有限元

中图法分类号 TG111.91 **文献标识码** A **文章编号** 0412-1961(2015)01-0100-07

STUDY ON THE INDENTATION BEHAVIORS OF BICRYSTALS BASED ON CRYSTAL PLASTICITY THEORY

YAN Wuzhu [1,2], *ZHANG Jiazhen* [1,2], *ZHOU Zhengong* [2], *YUE Zhufeng* [3]

1) Beijing Aeronautical Science and Technology Research Institute of COMAC, Beijing 102211
2) Center for Composite Materials and Structures, Harbin Institute of Technology, Harbin 150080
3) Department of Engineering Mechanics, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710129

Correspondent: ZHANG Jiazhen, professor, Tel: (010)57808880, E-mail: zhangjiazhen@comac.cc

Supported by National Natural Science Foundation of China (No.51271067)

Manuscript received 2014−06−25, in revised form 2014−10−13

ABSTRACT In the past decades, the indentation test has been widely used to determine the mechanical properties of materials. For the micro- or nano- indentation, the indentation response is complex since only one or two grains can be indented by the indenter. In order to investigate the indentation behavior of the grain boundary, the crystal plasticity theory was implemented into finite element model to simulate the indentation behavior of single crystals and bicrystals. The stress distributions on the indented surface and grain boundary were obtained. The results showed that the crystallographic orientations of the neighboring grains had a remarkable influence on the depth-load response and the resolved shear stress distribution of the indented bicrystals. Under the indentation load, stress concentration occurred at the grain boundary, and the stress at the grain boundary increases with the increase of mis-orientation angle of the two neighboring grains.

KEY WORDS indentation, crystal plasticity, single crystal, bicrystal, grain boundary, finite element

压痕测试, 尤其是微观和纳米压痕, 由于其简单、有效和非破坏性等优点, 在测定小体积材料力学性能方面具有突出的优势. 对于多晶材料的宏观压痕测试, 通常忽略其微观各向异性, 而在宏观上假设力学性能为各向同性, 从而使问题得到简化. 与此同时, 压痕尺寸效应和材料晶体学取向对纳米压痕行为的影响也得到了广泛的研究[1−3]. 研究[4−6]表明, 在纳观尺度内的压痕响应与宏观有显著不同. 对于微观和纳观压痕, 压头通常会压在单个或2个晶粒上. 这种情况下, 压痕行为呈现出显著的各向

* 国家自然科学基金项目资助51271067
收到初稿日期: 2014−06−25, 收到修改稿日期: 2014−10−13
作者简介: 闫五柱, 男, 1985年生, 博士
DOI: 10.11900/0412.1961.2014.00335

异性特征, 而这些特征是传统塑性理论所无法描述的. 因此, 基于晶体位错滑移演化的晶体学塑性模型被广泛用于描述多晶材料的微观力学行为.

晶体塑性理论最早可以追溯到Taylor[7], Hill和Rice[8]的开创性工作, 随后晶体塑性理论被引入有限元模拟中以考虑复杂边界条件、塑性流动和硬化准则[9]. 在过去几十年中, 晶体塑性理论被成功应用于晶体材料力学行为的模拟[10,11].

在压痕方面, 晶体塑性模型被用来研究晶体取向对压痕各向异性塑性行为的影响. 在单晶压痕实验研究方面, Dong等[12]采用声发射技术研究了(001)和(110)取向MgO单晶在压痕过程中的突变现象. Huang等[13]研究了气相沉积一维微晶须单晶W纳米压痕屈服行为特性. 这些研究通过实验从宏观唯象的角度描述了单晶材料各向异性的压痕行为. 另一方面, 多晶材料纳米压痕尺寸效应和塑性各向异性也得到大量研究. 在压痕尺寸效应方面, 应变梯度塑性理论得到广泛应用[14]. Kang等[15]通过对孪晶诱导塑性(TWIP)钢压痕实验研究了晶体取向对压痕模量和屈服的影响.

大多数多晶材料纳米或微观压痕均为实验研究, 难以获取纳米压痕细节信息, 需要有限元手段作为辅助. Xu等[16]研究了镍基单晶高温合金晶体取向与压痕蠕变表面形貌的相关性. Liu等[17]开展了Cu单晶纳米压痕三维晶体塑性有限元模拟. Li等[18]开展了2024铝合金纳米压痕三维晶体塑性有限元模拟. 然而先前的研究多侧重于压痕响应, 对压痕载荷下晶界的应力分布的研究鲜有报道. 摸清晶界应力分布规律是正确理解纳米压痕特性的关键所在. 本文作者在前期工作中[19]通过有限元模拟比较了不同取向的fcc单晶合金压痕蠕变和单轴拉伸蠕变, 并建立了两者之间的联系, 但压痕载荷下晶界的应力分布尚未得到充分研究.

本工作采用晶体塑性本构模型对双晶晶界压痕开展有限元模拟, 得到了压痕面和晶界应力分布特征. 为了便于对比, 对相应的单晶压痕也开展了数值模拟.

1　晶体塑性本构模型

本工作所用模型为基于运动学理论的晶体学本构方程. 晶体学塑性本构方程最先由Hill和Rice[8]提出, 假定塑性变形通过晶体位错滑移和扩散变形来实现, 滑移系分解切应力为滑移驱动力. 对于晶体学模型, 总变形梯度 $\boldsymbol{F}$ 可以分解为弹性和塑性2部分:

$$\boldsymbol{F}=\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\cdot\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}} \tag{1}$$

式中, $\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}$ 表示晶格畸变和刚性转动所产生的变形梯度, $\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}$ 则表示晶体沿着滑移方向的均匀剪切所对应的变形梯度.

由于晶体变形和旋转, 晶格向量伸长并旋转. 变形后滑移系 α 上的滑移方向可表示为:

$$\boldsymbol{m}^{*(\alpha)}=\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\boldsymbol{m}^{(\alpha)} \tag{2}$$

式中, $\boldsymbol{m}^{(\alpha)}$ 为变形前第 α 滑移系滑移方向的单位向量, $\boldsymbol{m}^{*(\alpha)}$ 为晶格畸变后第 α 滑移系滑移方向的单位向量. 晶格畸变后滑移面法向向量 $\boldsymbol{n}^{*(\alpha)}$ 可表示为:

$$\boldsymbol{n}^{*(\alpha)}=((\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}})^{-1})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{n}^{(\alpha)} \tag{3}$$

式中, $\boldsymbol{n}^{(\alpha)}$ 为变形前滑移面的单位法向量.

当前状态的速度梯度 $\boldsymbol{L}$ 由标准方程给出:

$$\boldsymbol{L}=\dot{\boldsymbol{F}}\boldsymbol{F}^{-1}=\boldsymbol{L}^{\mathrm{e}}+\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}} \tag{4}$$

式中, $\boldsymbol{L}^{\mathrm{e}}$ 为晶格畸变和刚性转动所产生的速度梯度, $\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}$ 表示晶体沿着滑移方向的均匀剪切所对应的速度梯度. 速度梯度也可表示为:

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{D}+\boldsymbol{W} \tag{5}$$

式中, $\boldsymbol{D}$ 和 $\boldsymbol{W}$ 分别为延伸和自旋张量. 当塑性变形是由位错滑移引起时, 塑性速度梯度可以表示为滑移系剪切率的线性组合形式:

$$\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}=\sum_{\alpha=1}^{N}\boldsymbol{P}^{(\alpha)}\dot{\boldsymbol{\gamma}}^{(\alpha)} \tag{6}$$

式中, $\dot{\boldsymbol{\gamma}}^{(\alpha)}$ 为第 α 滑移系滑移率, Schmid张量 $\boldsymbol{P}^{(\alpha)}$ 可表示为:

$$\boldsymbol{P}^{(\alpha)}=\frac{1}{2}(\boldsymbol{m}^{*(\alpha)}\otimes\boldsymbol{n}^{*(\alpha)}+\boldsymbol{n}^{*(\alpha)}\otimes\boldsymbol{m}^{*(\alpha)}) \tag{7}$$

定义 $\boldsymbol{\sigma}$ 为Cauchy应力张量, $\boldsymbol{\tau}$ 为加权Cauchy应力张量, 则有:

$$\boldsymbol{\tau}=|\boldsymbol{F}|\boldsymbol{\sigma} \tag{8}$$

$$\boldsymbol{T}=\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\boldsymbol{\tau}(\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}})^{-1} \tag{9}$$

式中, $\boldsymbol{T}$ 为滑移方向上的牵引力. 分解切应力 $\boldsymbol{\tau}^{(\alpha)}$ 可以通过Schmid张量表示为滑移方向上的牵引力分量:

$$\boldsymbol{\tau}^{(\alpha)}=\boldsymbol{P}^{(\alpha)}:\boldsymbol{T} \tag{10}$$

式中, $\boldsymbol{P}^{(\alpha)}$ 为滑移系 α 的Schmid因子.

对于率相关的本构方程, 滑移率可以表示为分解切应力和参考应力的函数. 滑移系剪切应变率 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 由Peirce等[20]给出:

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)}=\dot{\gamma}_0^{(\alpha)}\left[\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}}\right]\left|\frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}}\right|^{\frac{1}{m}-1} \tag{11}$$

式中, $g^{(\alpha)}$ 为参考剪切应力, m 为应变率敏感指数,

$\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 为参考剪切率. 函数 $g^{(\alpha)}$ 为晶体当前应变硬化状态, 假定 $g^{(\alpha)}$ 仅与滑移应变 γ 有关:

$$g^{(\alpha)} = g^{(\alpha)}(\gamma) \tag{12}$$

其中,

$$\gamma = \sum_{\alpha} \left| \gamma^{(\alpha)} \right| \tag{13}$$

式中, $\gamma^{(\alpha)}$ 为第 α 滑移系的滑移应变. 为简化程序, 假定材料应变硬化可由函数 $g^{(\alpha)}$ 演化得出[8]:

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \left| \dot{\gamma}^{(\beta)} \right| \tag{14}$$

式中, $h_{\alpha\beta}$ 为 γ 的函数, 在不对 β 求和时:

$$h_{\alpha\beta} = q_{\alpha\beta} h_{\beta} \tag{15}$$

式中, $q_{\alpha\beta}$ 为潜在硬化矩阵, h_{β} 为单硬化率[21]:

$$h_{\beta} = h_0 (1 - \frac{g_{\alpha}}{\tau_{\mathrm{s}}})^{AA} \tag{16}$$

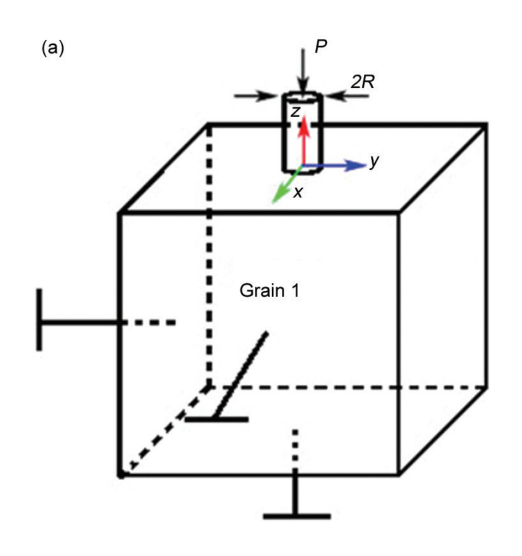
式中, h_0, τ_{s} 和 AA 为滑移系硬化参数, 适用于所有滑移系.

以上本构方程通过用户材料子程序UMAT植入ABAQUS开展有限元模拟. 该程序的正确性和有效性已经通过其它相关研究的验证[22].

2 模型建立

本工作所采用的三维模型示意图如图1所示. 试件为方形, 压头为圆柱形平压头, 压头半径为0.25 mm. 为了消除边界效应的影响, 压头直径与试件边长之比选为0.1. 边界条件如下: 试件底面约束 z 向, 左侧约束 y 向, 前方表面约束 x 方向(参照图1中坐标系统). 考虑单晶(图 1a)和双晶(图 1b) 2种情况, 在压头上方施加均布力 P=900 MPa. 创建全局坐标系, 坐标原点位于压痕区中心点. 对于双晶的情况, 设定平面 y=0为晶界, 将模型划分为2个不同取向的晶粒

模型被划分为6144个C3D8R单元, 见图2. 在接近压痕区域位置处对网格进行细化. 在用户材料子程序UMAT中, 晶体取向采用Euler角控制. 本工



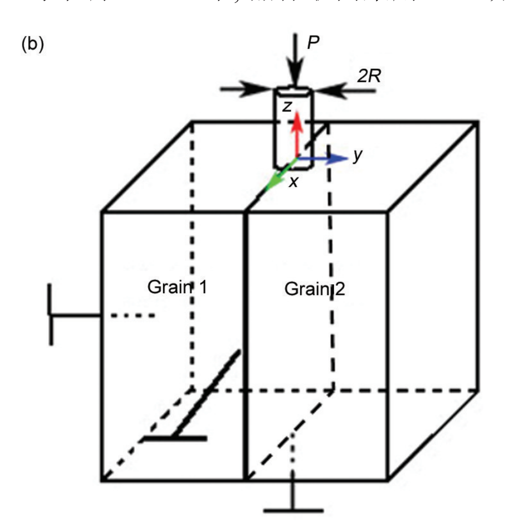


图1 压痕模型示意图

Fig.1 Schematic of the indentations performed on single crystal (a) and bicrystals (b) (R—radius of the indenter, P—indentation load)

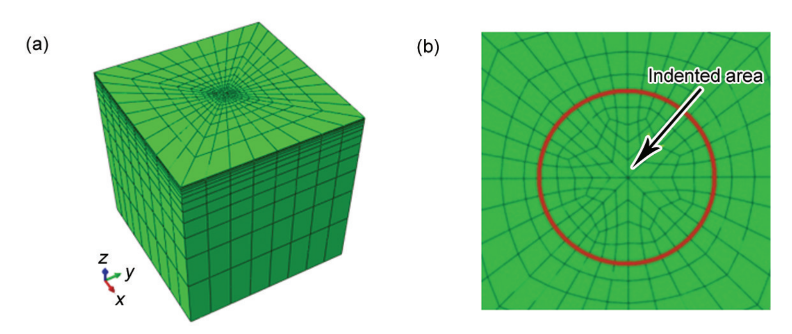


图2 模型有限元网格

Fig.2 Finite element mesh of the model

(a) mesh of the whole model (b) mesh of the indented area

作采用的3个基本晶体取向见表1. 在初步模拟阶段, 每个晶体取向被赋予整个模型, 对应了3种单晶取向Case A, Case B和Case C. 同时, 任意2个取向的组合产生3种不同的双晶取向Case D, Case E和Case F. 以上6种情况及其晶体取向见表1.

本工作的单晶和双晶材料均采用镍基单晶高温合金DD3, 该材料被广泛应用于燃气涡轮叶片中. 表2给出了晶粒的力学属性, 力学参数均由镍基单晶高温合金DD3拉伸测试获得[23]. 假定八面体滑移系{111}<110>开动, 可以模拟fcc金属在典型条件下的变形.

3 结果与分析

3.1 晶体取向对压痕深度扩展的影响

研究[19]表明, 晶体取向对压痕深度扩展具有显著的影响. Yan等[19]研究了[001], [011]和[111]取向镍基单晶合金的压痕蠕变行为, 结果表明,压痕深度h及扩展率$\dot{h}$具有以下规律: $h_{[001]}<h_{[011]}<h_{[111]}$, $\dot{h}_{[001]}<\dot{h}_{[011]}<\dot{h}_{[111]}$. 这种现象一般认为是由各向异性所引起的不同滑移系和应力集中所致.

一般来说, 晶体取向是影响单晶力学性能的重要因素, 并且取向差异的大小决定了不同取向单晶力学性能差异的大小. 图3给出了3种不同取向单晶压痕深度随载荷的变化. 值得注意的是, 压痕柔度($\mathrm{d}h/\mathrm{d}P$)随晶体取向的改变而变化, Case A的压痕柔度最大, Case C的压痕柔度最小. 由图3可以看出, Case A与Case C的取向差角最大, 而Case B与Case C的取向差角最小. 这对于双晶压痕响应的分析提供了理论指导.

图4对比了双晶及相应组成单晶的压痕深度-载荷曲线. 可以看出, 双晶的压痕柔度处于2个组成

表1 晶粒Euler角

Table 1 Euler angles of the grains

Crystal	Case	Grain No.	φ / (°)	θ / (°)	ϕ / (°)
Single crystal	A	1	0.0	0.0	0.0
	B	1	45.0	0.0	0.0
	C	1	65.21	50.76	−63.35
Bicrystal	D	1	45.0	0.0	0.0
		2	0.0	0.0	0.0
	E	1	65.21	50.76	−63.35
		2	0.0	0.0	0.0
	F	1	65.21	50.76	−63.35
		2	45.0	0.0	0.0

Note: φ—precession angle, θ—nutation angle, ϕ—rotation angle

表2 镍基单晶高温合金DD3力学参数[23]

Table 2 Mechanical properties of nickel-based single crystal superalloy DD3[23]

Mechanical parameter	Value	Unit
Poisson's ratio ν	0.33	
Young's modulus E	210	GPa
Shear modulus G	83	GPa
Strain rate sensitivity exponent m	0.02	
Reference shear rate $\dot{\gamma}_0^{(\alpha)}$	0.03	s^{-1}
Initial resolved shear stress τ_0	500	MPa
Hardening law parameter h_0	600	MPa
Saturation resolved shear stress τ_s	585	MPa
Hardening law parameter AA	1.3	
Reference strain rate $G_{\alpha 0}$	300	MPa

单晶的压痕柔度之间, 这是由所组成晶粒的取向和力学性能差异所引起.

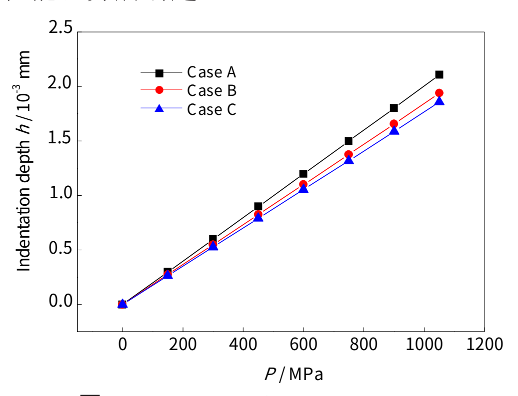


图3 晶体取向对深度-载荷取向的影响

Fig.3 Effect of crystallographic orientation on the propagation of indentation depth with applied load P

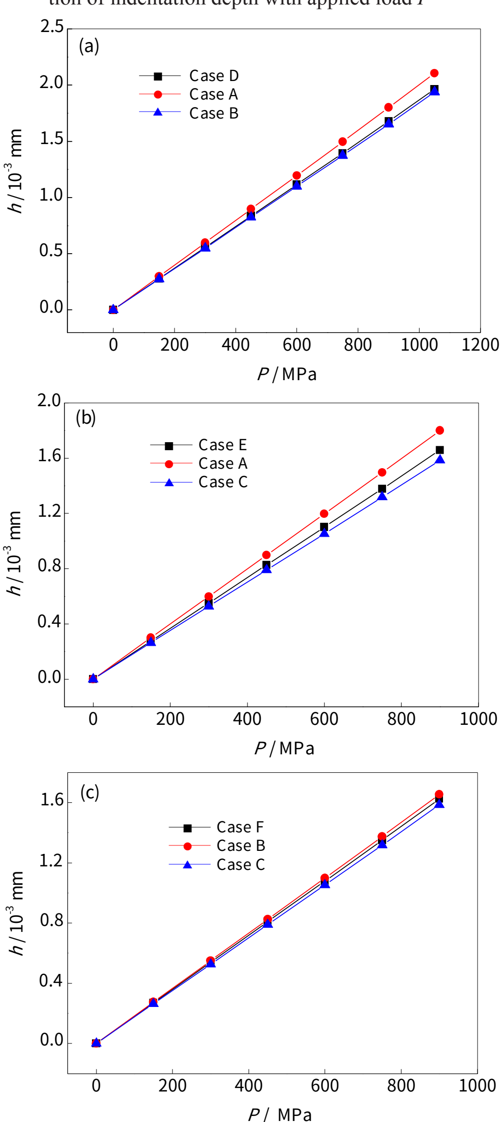


图4 单晶和双晶压痕深度-载荷曲线

Fig.4 Depth-load curves of single crystals and bicrystals

(a) Cases A, B and D

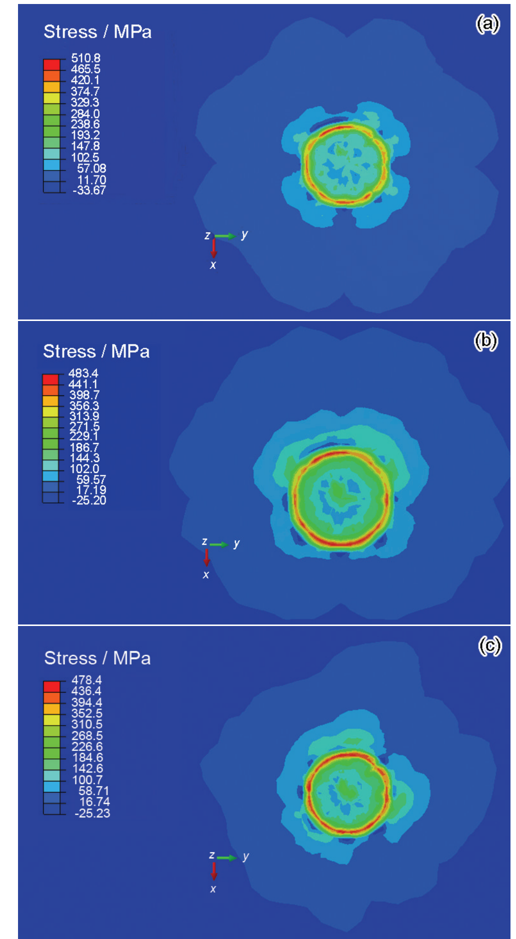
(b) Cases A, C and E

(c) Cases B, C and F

3.2 分解切应力分布

在晶体学本构模型中, 分解切应力为晶体学滑移的驱动力, 滑移系的开动和滑移均与分解切应力的大小有关. 图5给出了不同取向单晶压痕面上的分解切应力分布. 可以看出, 晶体取向对压痕表面分解切应力大小和分布有较大影响. 观察压痕附近应力分布特征可以看出, 对于Case A, Case B和Case C, 应力分布分别近似呈四重对称、一重对称和三重对称.

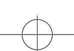
对于纳米压痕, 压头有可能会压在晶界位置处. 这种情况下, 相邻晶粒属性差异对压痕行为的影响需要进一步研究. 图6给出了3种不同取向双晶的压痕面分解切应力分布. 可以看出, 在晶界位置处存在明显的应力不连续性. 相同压痕载荷下, Case E所对应的压痕应力最大, 这是由于相邻2个晶粒的取向差角最大. 由图6还可以看出, 单个晶粒的压痕应力图案并没有改变, 仅仅是大小有变化. 双晶压痕表面应力分布的形状是由相应的单晶压



Color online

图5 不同取向单晶压痕面上分解切应力分布

Fig.5 Resolved shear stress distributions on the indented surface for Case A (a), Case B (b) and Case C (c)



痕分布图拼合而成(图5), 晶粒之间的相互影响十分有限.

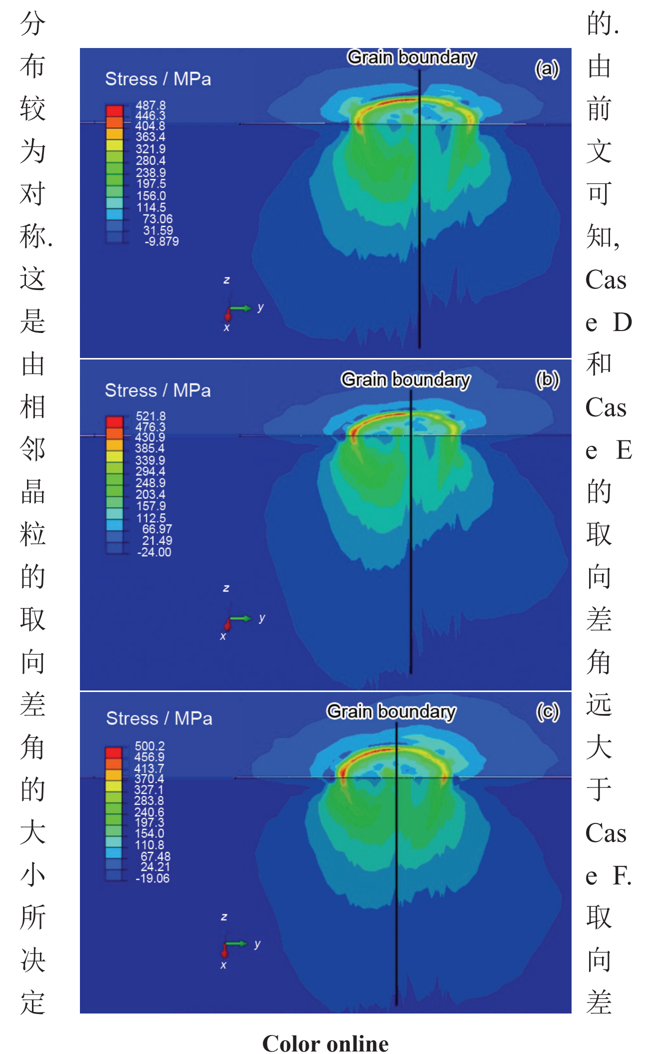
对于多晶材料, 微观应力分布与晶粒的取向有关. 尤其是晶界处应力分布对相邻晶粒取向差角较为敏感. Li 等[18]采用晶体塑性理论对2024铝合金开展了三维有限元模拟, 并指出, 较小的晶界角使得晶粒之间的应力具有连续性, 而大的晶界角会成为障碍, 在晶界处引起应力集中. 然而目前为止, 晶界位置处的应力分布尚未被深入研究.

Color online

图6　不同取向双晶压痕面上分解切应力分布

Fig.6 Resolved shear stress distributions on the indented surface for Case D (a), Case E (b) and Case F (c)

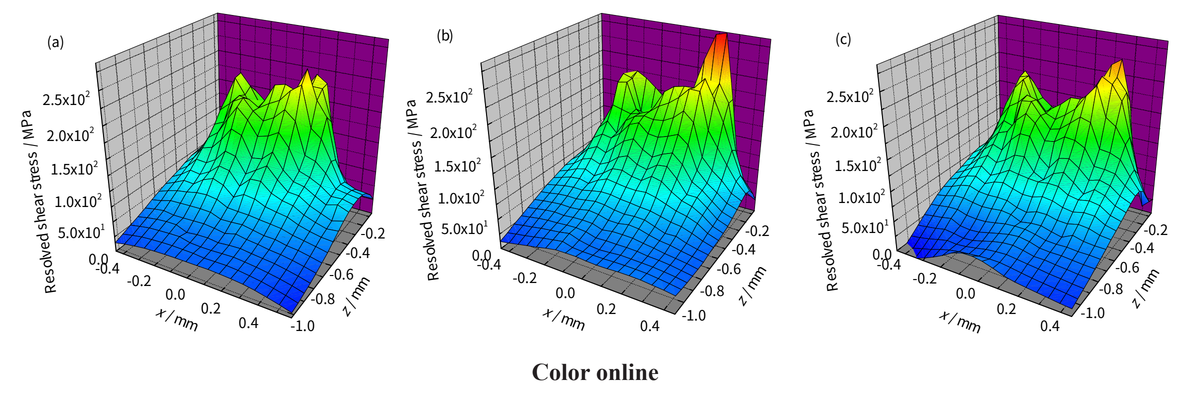
图7给出了3个不同取向双晶在平面x=0 (垂直于晶界)上的分解切应力分布. 可以看出, 在晶界处存在明显的应力不连续现象, 同时在压头下方晶界处存在应力集中. 对于Case D 和Case E, 应力相对于晶界呈非对称分布; 对于Case F, 应力相对于晶界分布较为对称. 这是由相邻晶粒的取向差角的大小所决定的. 由前文可知, Case D 和 Case E 的取向差角远大于 Case F. 取向差



Color online

图7　不同取向双晶平面x=0上的分解切应力分布

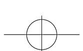
Fig.7 Distributions of resolved shear stress on the plane of x=0 for Case D (a), Case E (b) and Case F (c)



Color online

图8　不同取向双晶晶界(y=0)分解切应力分布

Fig.8 Resolved shear stress distributions at the grain boundary (y=0) for Case D (a), Case E (b) and Case F (c)



角越小, 相对于晶界的应力分布越趋向于对称.

图8进一步给出了压头下方晶界(y=0)上的分解切应力分布. 可以看出, 在坐标(0.25, 0, −0.06)和(−0.25, 0, −0.06)处, 即压头边缘与晶界的交点处发生严重的应力集中. 相邻晶粒的取向差角对晶界处应力集中程度有显著影响. Case E的晶界应力最大, 这是由于Case E所具有的晶界角最大.

4 结论

(1) 单晶压痕柔量(深度-载荷曲线斜率)与晶体取向有关. 本工作所研究的3种取向的单晶Case A, Case B和Case C, 其压痕面上的分解切应力分布分别呈现四重对称、一重对称和三重对称.

(2) 相邻晶粒的晶体取向差角会在晶界位置引起应力不连续和应力集中, 应力分布相对于晶界的对称性也受晶体取向差角影响.

(3) 相邻晶粒取向差角对晶界位置处的应力集中程度有较大影响. 本工作中, Case E晶界应力集中最严重, 最大应力位于压头边缘与晶界的交点处.

参考文献

[1] Cheng Y T, Cheng C M. *Mater Sci Eng*, 2004; R44: 91

[2] Diard O, Leclereq S, Rousselier G, Cailletaud G. *Int J Plast*, 2005; 21: 691

[3] Raabe D, Sachtleber M, Zhao Z, Roters F, Zaefferer S. *Acta Mater*, 2001; 49: 3433

[4] Wu X, Kalidindi S R, Necker C, Salem A A. *Acta Mater*, 2007; 55: 423

[5] Ma Q, Clarke D R. *J Mater Res*, 1995; 10: 853

[6] Nix W D, Gao H. *J Mech Phys Solids*, 1998; 46: 411

[7] Taylor G I. *J Inst Met*, 1938; 62: 307

[8] Hill R, Rice J R. *J Mech Phys Solids*, 1972; 20: 401

[9] Li H W, Feng L, Yang H. *Trans Nonferrous Met Soc China*, 2013; 23: 3729

[10] Wen Z X, Yue Z F. *Comput Mater Sci*, 2007; 40: 140

[11] Segurado J, LLorca J. *Int J Plast*, 2010; 26: 806

[12] Dong Z G, Huang H, Kang R. *Mater Sci Eng*, 2010; A527: 4177

[13] Huang H, Wu Y Q, Wang S L, He Y H, Zou J, Huang B Y, Liu C T. *Mater Sci Eng*, 2009; A523: 193

[14] Chicot D. *Mater Sci Eng*, 2009; A499: 454

[15] Kang S, Jung Y, Yoo B, Jang J, Lee Y. *Mater Sci Eng*, 2012; A532: 500

[16] Xu B X. Yonezu A, Yue Z F, Chen X. *Comput Mater Sci*, 2009; 46: 275

[17] Liu Y, Wang B, Yoshino M, Roy S, Lu H, Komanduri R. *J Mech Phys Solids*, 2005; 53: 2718

[18] Li L, Shen L M, Proust G, Moy C K S, Ranzi G. *Mater Sci Eng*, 2013; A579: 41

[19] Yan W Z, Wen S F, Liu J, Yue Z F. *Mater Sci Eng*, 2010; A527: 1850

[20] Peirce D, Asaro R J, Needleman A. *Acta Metall*, 1982; 30: 1087

[21] Anand L, Kothari M. *J Mech Phys Solids*, 1996; 44: 525

[22] Fang X, Yan W Z, Gao H S, Yue Z F, Liu J, Wang F S. *Finite Elem Anal Des*, 2012; 60: 64

[23] Wan J S, Yue Z F. *Appl Math Mech*, 2004; 25(1): 39
(万建松, 岳珠峰. 应用数学和力学, 2004; 25(1): 39)

(责任编辑:肖素红)

